

University of Groningen

Time-dependent current-density-functional theory for molecules

Faassen, Meta van

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2005

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Faassen, M. V. (2005). *Time-dependent current-density-functional theory for molecules*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

STELLINGEN

behorend bij het proefschrift

Time-Dependent Current-Density-Functional Theory for Molecules

van Meta van Faassen

1. Het feit dat onze stroomdichtheidsfunctionaaltheorie met name de waterstofketens niet correct beschrijft komt niet doordat het nauwkeurig beschrijven van deze ketens ten opzichte van andere ketens het moeilijkst is met dichtheidsfunctionaaltheorie, zoals beweerd door Kümmel *et al.*, maar lijkt eerder een gevolg van het falen van de VK-functionaal zelf.

S. Kümmel, L. Kronik en J.P. Perdew, Phys. Rev. Lett. 93, 213002 (2004)

Hoofdstuk 10 van dit proefschrift

- 2.

- a. De onverwacht hoge polariseerbaarheid van polybutatrieen oligomeren ten opzichte van polydiacetyleen, zoals voorspeld door Hartree-Fock theorie, laten zien dat het noodzakelijk is dat dit systeem verder wordt onderzocht met hoogwaardige gecorreleerde methoden.
- b. Gezien de goede resultaten van de VK-functionaal voor de polariseerbaarheid van geconjugeerde systemen is het zeer onwaarschijnlijk dat de Hartree-Fock resultaten voor polybutatrieen accuraat zijn.

P.A. Perpète, B. Champagne en B. Kirtman, J. Chem. Phys. 107, 2463 (1997)

Hoofdstuk 6 van dit proefschrift

3. Het is verontrustend dat de gevoeligheid van responseeigenschappen van atomen en molekulen verkregen met de VK-functionaal voor een verandering van de transversale exchange-correlatie kernel in het hoge dichtheidsgebied zo groot is, in tegenstelling tot de gevoeligheid van het zwak inhomogene elektronengas voor zo'n verandering.

4. De grootte van het imaginaire stuk van de excitatieënergie van atomen en molekulen zoals berekend met de frequentie-afhankelijke VK-functionaal is een indicatie voor de kwaliteit van de functionaal voor een bepaalde overgang.

C.A. Ullrich en K. Burke, J. Chem. Phys. 121, 28 (2004)

5. De verlaging van de statische polariseerbaarheid van oligomeren ten gevolge van de VK-functionaal komt door het omhoogschuiven van de excitatieënergieën met een groot overgangsdipoolmoment en het overhevelen van oscillatorsterkte van de laagste overgang naar hogere excitaties.

Hoofdstuk 9 van dit proefschrift

6. Als de geheeltallige discontinuïteiten de oorsprong zijn van het falen van de ALDA in het geval van ladingsoverdrachtsexcitaties, dan zal de VK-functionaal hier niet voor kunnen corrigeren.

D.J. Tozer, J. Chem. Phys. 119, 12697 (2003)

7. Injecties met BTX-A, in de volksmond Botox®, op multilevel niveau in spastische spieren hebben een tijdelijk effect op het looppatroon van kinderen met een cerebrale parese.

K. Desloovere et al., European Journal of Neurology 8, 75 (2001)

8. Het onterechte vermoeden dat de B3LYP functionaal een universele functionaal is, leidt tot het klakkeloos toepassen van deze functionaal door veel “black box” gebruikers van dichtheidsfunctionaalmethoden.

9. Vanwege de angst voor diefstal of verlies van het paspoort en de onwetendheid over het feit dat het is toegestaan om een identiteitskaart naast het paspoort te bezitten, vind een groot aantal onnodige overtredingen op de Wet op de uitgebreide identificatieplicht plaats.

10. De uitdrukking “goedkoop is duurkoop” geldt zeker voor het kiezen van bursalen boven AIO's en OIO's.

11. Mensen die lid worden van de postcodeloterij doen dit vaak uit afgunst voor de mogelijke winst van de burens en niet voor het goede doel.

12. De enige zinloze vraag, is een vraag die niet wordt gesteld.

The Action Principles, Bill FitzPatrick